

Universidade Federal do Espírito Santo
Relatório Técnico - REL-LCAD-01/2012
Desenvolvimento do Método Difusão Dinâmica
para a Equação de Advecção-Difusão-Reação

Suzi Werner, Isaac Pinheiro dos Santos e Lucia Catabriga

9 de novembro de 2012

Resumo

Na equação de advecção-difusão-reação podem ocorrer fenômenos de propagação de frente de concentração do fluido, gerando regiões de fortes gradientes de concentração em várias partes do domínio. Este fenômeno produz dificuldades numéricas que podem resultar em perda de exatidão da solução. O método de elementos finitos de Galerkin clássico não é adequado para resolver este tipo de problema, apresentando soluções não físicas conhecidas como instabilidades numéricas [7]. Soluções estáveis de problemas predominantemente advectivos podem ser obtidas via métodos estabilizados ou métodos multiescalas, tais como SUPG (*Streamline Upwind Petrov Galerkin*) [3], GLS (*Galerkin/Least Square*) [11], RFB (*Residual-Free Bubble*) [2], VMS (*Variational Multiscale*) [12] e SGS (*Subgrid Stabilization*) [10].

Apesar de grande parte dos métodos de elementos finitos estabilizados ou multiescalas mencionados conduzirem às soluções numéricas globalmente estáveis, eles não evitam a possibilidade de ocorrer oscilações localizadas nas vizinhanças de altos gradientes [16]. Neste caso, para a obtenção de uma solução numérica livre de oscilações localizadas, pode-se recorrer aos métodos de captura de descontinuidades, como por exemplo, o método *Consistent Approximate Upwind* (CAU) [8]. Vale ressaltar que a estabilidade e precisão das soluções obtidas por essas metodologias dependem do projeto adequado dos parâmetros de estabilização [16].

Recentemente, o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica (DD) foi introduzido em [1] para a equação de transporte advectivo-difusivo-reativo estacionário. Esta metodologia, baseada no método *Nonlinear Subgrid Stabilization* (NSGS) [17, 16], consiste em uma decomposição multiescala do espaço de aproximação e do campo de velocidades em escalas resolvidas e não-resolvidas. Um operador dissipativo não-linear agindo isotropicamente em todas as escalas da discretização é adicionado à formulação clássica de Galerkin. A quantidade de difusão artificial é determinada pela solução da equação na escala resolvida à nível de elemento, conduzindo a um método auto-adaptativo e livre de parâmetros de estabilização.

Neste relatório técnico o método de estabilização submalha Difusão Dinâmica é estendido para problemas transientes de advecção-difusão-reação, usando o cenário de discretização $\mathbb{P}_1/bolha$. Experimentos numéricos mostrando a performance desta nova metodologia são apresentados.

Capítulo 1

Método de Estabilização Difusão Dinâmica Para Problemas de Transporte Transientes

Considere a equação genérica de transporte advectivo-difusivo-reativo transiente cuja solução $u(\mathbf{x}, t)$ satisfaz

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla u) + \mathbf{v} \cdot \nabla u + \sigma u = f \quad \text{em } \Omega \times (0, t_f); \quad (1.1)$$

$$u = g \quad \text{em } \Gamma \times (0, t_f); \quad (1.2)$$

$$u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}) \quad \text{em } \Omega, \quad (1.3)$$

onde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ é um domínio limitado aberto com uma fronteira poligonal $\Gamma = \partial\Omega$, $(0, t_f)$ o intervalo aberto de tempo ($t_f > 0$), $t \in (0, t_f)$ o tempo e $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$ o vetor posição. Os coeficientes desta equação são:

- $\mathbf{v} : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}^2$, o campo de velocidades;
- $\mathbf{D} : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}^{2,2}$ é o tensor de difusividade, simétrico e positivo definido;
- $\sigma : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, o coeficiente de reação, onde $\sigma > 0$ para dissipação, destruição ou absorção e $\sigma < 0$ para produção;
- $f : \Omega \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, o termo de fonte;
- $g : \Gamma \times (0, t_f) \rightarrow \mathbb{R}$, a condição de contorno;

- $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, a condição inicial,

considerados funções de (\mathbf{x}, t) ou \mathbf{x} suaves o suficiente. Assume-se que

$$\sigma - \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{v} \geq \sigma_0 \quad \text{em } \Omega \times (0, t_f), \quad (1.4)$$

onde $\sigma_0 \geq 0$ é uma constante com $\sigma_0 > 0$ no caso estacionário [14].

A formulação variacional do problema (1.1)-(1.2)-(1.3) é dado por: achar $u(\mathbf{x}, t) \in V_g$, para todo $t \in (0, t_f)$, tal que

$$\left(w, \frac{\partial u}{\partial t}\right) + a(w, u) = (w, f), \quad \forall w \in V, \quad (1.5)$$

onde

- $a(w, u) = (\nabla w, \mathbf{D}\nabla u) + (w, \mathbf{v} \cdot \nabla u) + (w, \sigma u)$,
com $(w, u) = \int_{\Omega} w u d\Omega$ o produto interno usual em $L^2(\Omega)$, o espaço das funções mensuráveis quadrado integráveis em Ω ;
- $V_g = \{u \in H^1(\Omega); u|_{\Gamma} = g\}$, o espaço das funções admissíveis ou testes,
com $H^1(\Omega) = \{u \in L^2(\Omega); \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \in L^2(\Omega)\}$ e
- $V = H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega); u|_{\Gamma} = 0\}$, o espaço das funções pesos.

Para obter o problema discretizado, considera-se uma partição $\mathcal{T}_h = \{\Omega_e\}$ do domínio Ω em n_{el} elementos (triângulos ou quadriláteros), Ω_e , $e = 1, 2, \dots, n_{el}$ tal que

$$\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega_e \quad \text{e} \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset, \quad i, j = 1, 2, \dots, n_{el}, \quad i \neq j.$$

No modelo discreto, utilizam-se os espaços de aproximações de dimensão finita $V_{g,h} \subset V_g$ e $V_h \subset V$, dados por

$$V_{g,h} = \{u_h \in H^1(\Omega) \text{ tal que } u|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_r, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h \text{ e } u|_{\Gamma} = g\} \quad (1.6)$$

$$V_h = \{u_h \in H_0^1(\Omega) \text{ tal que } u|_{\Omega_e} \in \mathbb{P}_r, \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}, \quad (1.7)$$

com \mathbb{P}_r denotando o espaço de polinômios de grau $\leq r$ definidos em Ω_e e h o parâmetro característico de malha. A forma discreta do modelo (1.5) é dada por: achar $u_h \in V_{g,h}$, $\forall t \in (0, t_f)$, tal que

$$\left(w_h, \frac{\partial u_h}{\partial t}\right) + a(w_h, u_h) = (w_h, f), \quad \forall w_h \in V_h. \quad (1.8)$$

Para o método de elementos finitos de Galerkin, considera-se o mesmo espaço de aproximação para as funções admissíveis e pesos. Neste caso,

$$u_h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_{eq}} N_j(\mathbf{x}) d_j(t), \quad (1.9)$$

onde n_{eq} é o número de pontos nodais incógnitas (número de equações), $N_j(\mathbf{x}), j = 1, 2, \dots, n_{eq}$ são as funções de interpolação globais do método de Galerkin e $d_j(t)$ é o valor calculado da solução aproximada no ponto nodal j , no tempo t . A função peso é definida de forma análoga,

$$w_h(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n_{eq}} N_i(\mathbf{x}) w_i. \quad (1.10)$$

Usando uma formulação Semidiscreta, substitui-se (1.9) e (1.10) na equação (1.8) para obter um sistema de equações diferenciais ordinárias, que pode ser resolvido por um dos métodos trapezoidais generalizados.

O método Difusão Dinâmica é proposto para dois cenários de discretização: $\mathbb{P}_1/\text{dois-níveis}$ e $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ (ver [1] para maiores detalhes). Neste trabalho, utiliza-se o cenário $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ (ver Fig. 1.1). Neste caso, a partição \mathcal{T}_h do domínio Ω é formada por elementos triangulares. Por simplicidade, considere $g = 0$ e o seguinte enriquecimento do espaço de aproximação V_h , dado em (1.7) com $r = 1$:

$$V_E = V_h \oplus V_B, \quad (1.11)$$

onde V_B denota o espaço de funções bolhas dado por

$$V_B = \{v \text{ tal que } v|_{\Omega_e} \in H_0^1(\Omega_e), \forall \Omega_e \in \mathcal{T}_h\}.$$

Uma função bolha $\varphi_B \in V_B$ é, portanto, uma função que possui suporte contido em um único elemento $\Omega_e \in \mathcal{T}_h$ e satisfaz

$$\varphi_B(\mathbf{x}) > 0, \forall \mathbf{x} \in \Omega_e;$$

$$\varphi_B(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0, & \forall \mathbf{x} \in \partial\Omega_e; \\ 1, & \text{no baricentro do triângulo } \Omega_e. \end{cases}$$

A função bolha utilizada no cenário $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$ é definida por

$$\varphi_B(\mathbf{x}) = 27N_1^e(\mathbf{x})N_2^e(\mathbf{x})N_3^e(\mathbf{x}),$$

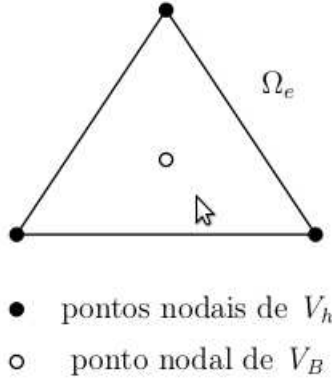


Figura 1.1: Representação do cenário $\mathbb{P}_1/bolha$

onde $N_j^e(\mathbf{x})$ representa a função de forma local do método de Galerkin associada ao ponto nodal (macro) j , para $j = 1, 2, 3$ do elemento Ω_e .

No contexto dos métodos multiescala, V_h representa o espaço das escalas resolvidas (espaço macro) e V_B representa o espaço das escalas não resolvidas (espaço micro ou submalha) [16]. Em geral, o espaço macro V_h é formado por funções contínuas em Ω que são lineares em cada elemento $\Omega_e \in \mathcal{T}_h$. A equação (1.11) implica que toda função $u_E \in V_E$ tem a seguinte decomposição única

$$u_E = u_h + u_B$$

com $u_h \in V_h$ representando a parte macro da solução e $u_B \in V_B$ representando a parte micro ou submalha da solução.

O método de estabilização Difusão Dinâmica para o problema (1.1)-(1.2)-(1.3) consiste em: dado $t \in (0, t_f)$, achar $u_E = u_h + u_B \in V_E$, com $u_h \in V_h, u_B \in V_B$, tal que $u_E(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$ e

$$(w_E, \frac{\partial u_E}{\partial t}) + a(w_E, u_E) + \sum_{\Omega_e} \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \xi(u_h) \nabla u_E d\Omega = (w_E, f), \quad \forall w_E \in V_E, \quad (1.12)$$

onde

$$\xi(u_h) = \begin{cases} \frac{1}{2} \zeta(h) \frac{|R(u_h)|}{|\nabla u_h|}, & \text{se } |\nabla u_h| > tol_\xi; \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (1.13)$$

com

$$\varsigma(h) = \begin{cases} 2\sqrt{\text{meas}\Omega_e}, & \text{se } \Omega_e \cap \Gamma_+ \neq \emptyset, \quad \Gamma_+ = \{\mathbf{x} \in \Gamma; \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} > 0\}; \\ \sqrt{\text{meas}\Omega_e}, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (1.14)$$

denotando o parâmetro característico submalha e

$$R(u_h) = \frac{\partial u_h}{\partial t} - \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla u_h) + \mathbf{v} \cdot \nabla u_h + \sigma u_h - f \quad \text{sobre } \Omega_e.$$

O método é resolvido através de um processo iterativo no tempo e no espaço, cuja solução inicial $u_0(\mathbf{x})$ é dada. O processo iterativo no espaço é definido por: dado u_E^i , achar u_E^{i+1} satisfazendo

$$(w_E, \frac{\partial u_E^{i+1}}{\partial t}) + a(w_E, u_E^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega = (w_E, f), \quad \forall w_E \in V_E. \quad (1.15)$$

Note que

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega &= \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega \\ &+ \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega + \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega. \end{aligned}$$

Usando a primeira identidade de Green ([13]), tem-se

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega = - \int_{\Omega_e} \Delta w_h u_B^{i+1} d\Omega + \int_{\partial\Omega_e} (\nabla w_h \cdot \mathbf{n}) u_B^{i+1} d\Gamma = 0,$$

pois $\Delta w_h = 0$ em cada elemento Ω_e e $u_B^{i+1} = 0$ em $\partial\Omega_e$. Analogamente, tem-se

$$\int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega = - \int_{\Omega_e} \Delta w_B u_h^{i+1} d\Omega + \int_{\partial\Omega_e} (\nabla w_B \cdot \mathbf{n}) u_h^{i+1} d\Gamma = 0. \quad (1.16)$$

De fato, usando a segunda identidade de Green ([13]),

$$\int_{\Omega_e} (w_B \Delta u_h^{i+1} - u_h^{i+1} \Delta w_B) d\Omega = \int_{\partial\Omega_e} (w_B \nabla u_h^{i+1} \cdot \mathbf{n} - u_h^{i+1} \nabla w_B \cdot \mathbf{n}) d\Gamma$$

e as hipóteses $\Delta u_h^{i+1} = 0$ em Ω_e e $w_B = 0$ em $\partial\Omega_e$, segue-se o resultado em (1.16). Portanto, para o cenário $\mathbb{P}_1/\text{bolha}$, o termo de estabilização extra adicionado à formulação de Galerkin em cada elemento Ω_e é dado por

$$\xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_E \cdot \nabla u_E^{i+1} d\Omega = \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega. \quad (1.17)$$

Para acelerar a convergência do método, a seguinte estratégia para calcular $\xi(u_h^i)$ pode ser utilizada [17]:

$$\begin{aligned} \xi(u_h^i) &= c_b^{i+1} \zeta(h); \\ c_b^{i+1} &= \omega \tilde{c}_b^{i+1} + (1 - \omega) \tilde{c}_b^i, \text{ com } \omega \in [0, 1] \text{ escolhido adequadamente}; \\ \tilde{c}_b^{i+1} &= \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{|R(u_h^i)|}{|\nabla u_h^i|}, & \text{se } |\nabla u_h^i| > \text{tol}_\xi; \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.18)$$

A equação (1.15) pode ser particionada em duas outras, uma associada às escalas resolvidas:

$$\begin{aligned} (w_h, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t}) + a(w_h, u_h^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega + (w_h, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t}) + \\ a(w_h, u_B^{i+1}) = (w_h, f), \forall w_h \in V_E \end{aligned} \quad (1.19)$$

e a outra associada às escalas submalhas:

$$\begin{aligned} (w_B, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t}) + a(w_B, u_h^{i+1}) + (w_B, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega + \\ a(w_B, u_B^{i+1}) = (w_B, f), \quad \forall w_B \in V_E. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Diferente do caso estacionário, as equações (1.19) e (1.20) resultam em um sistema local de equações diferenciais ordinárias fortemente acoplado da forma

$$\begin{bmatrix} M_{hh} & M_{hB} \\ M_{Bh} & M_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{U}_h \\ \dot{U}_B \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K_{hh} & K_{hB} \\ K_{Bh} & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_h \\ U_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_h \\ F_B \end{bmatrix}, \quad (1.21)$$

onde

- U_h e U_B são vetores que representam as soluções u_h e u_B nos pontos nodais macro e micro, respectivamente, de cada elemento Ω_e ;
- \dot{U}_h e \dot{U}_B são vetores que representam as variações temporais $\frac{\partial u_h}{\partial t}$ e $\frac{\partial u_B}{\partial t}$ das soluções u_h e u_B nos pontos nodais macro e micro, respectivamente, de cada elemento Ω_e ;
- M_{hh} , M_{hB} , M_{Bh} e M_{BB} são matrizes locais de massa associadas aos termos $(w_h, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t})$, $(w_h, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t})$, $(w_B, \frac{\partial u_h^{i+1}}{\partial t})$ e $(w_B, \frac{\partial u_B^{i+1}}{\partial t})$, respectivamente;

- K_{hh} é a matriz local de rigidez associadas ao termo

$$a(w_h, u_h^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_h \cdot \nabla u_h^{i+1} d\Omega;$$

- K_{hB} e K_{Bh} são matrizes locais de rigidez associadas aos termos

$$a(w_h, u_B^{i+1}) \quad \text{e} \quad a(w_B, u_h^{i+1}),$$

respectivamente;

- K_{BB} é a matriz local de rigidez associadas ao termo

$$a(w_B, u_B^{i+1}) + \sum_{\Omega_e} \xi(u_h^i) \int_{\Omega_e} \nabla w_B \cdot \nabla u_B^{i+1} d\Omega;$$

- F_h e F_B são vetores associados aos termos (w_h, f) e (w_B, f) , respectivamente, em cada elemento Ω_e ;

Devido ao acoplamento do sistema (1.21), utilizando o processo de condensação estática para eliminar a variável U_B , em cada elemento Ω_e , obtém-se uma equação associada à macro escala em função da variável \dot{U}_B :

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h + \widehat{N}\dot{U}_B = \widehat{F}, \quad (1.22)$$

onde

$$\begin{aligned} \widehat{M} &= M_{hh} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}M_{Bh}; \\ \widehat{K} &= K_{hh} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}K_{Bh}; \\ \widehat{N} &= M_{hB} - K_{hB}(K_{BB})^{-1}M_{BB}; \\ \widehat{F} &= F_h - K_{hB}(K_{BB})^{-1}F_B. \end{aligned}$$

O valor de U_B é obtido pela expressão

$$U_B = (K_{BB})^{-1} \left[F_B - K_{Bh}U_h - M_{hB}\dot{U}_h - M_{BB}\dot{U}_B \right].$$

Uma forma de evitar o aparecimento de \dot{U}_B em (1.22) é assumir que as escalas submalhas são *quase estáticas* [5, 4, 15, 19], isto é,

$$\frac{\partial u_B}{\partial t} \approx 0. \quad (1.23)$$

Neste caso, as matrizes M_{hB} e M_{BB} e o vetor \dot{U}_B em (1.21) se anulam e o procedimento de condensação estática resulta no seguinte sistema local de equações diferenciais ordinárias:

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h = \widehat{F}. \quad (1.24)$$

A validade da hipótese (1.23) é discutida em [5]. Esta hipótese é utilizada para simplificar as equações (1.19) e (1.20), que são fortemente acopladas. O seu uso requer um esquema bastante preciso de integração no tempo, de forma que a variação temporal da solução seja bem representada pela solução associada à macro escala [19]. Trabalhos recentes considerando escalas submalhas transientes para a Equação de Navier-Stokes incompressível são apresentados em [6, 9].

O sistema global

$$\widehat{M}\dot{U}_h + \widehat{K}U_h = \widehat{F} \quad (1.25)$$

associado a (1.24) é resolvido via um algoritmo preditor-multicorretor, descrito da seguinte forma: sejam n o contador de passos no tempo, Δt o passo no tempo, \dot{U}_n e U_n as aproximações para $\dot{U}_h(t_n)$ e $U_h(t_n)$, respectivamente. Dados \dot{U}_n e U_n , o algoritmo pode ser resumido nos seguintes passos:

Fase de Predição:

$$\begin{aligned} i &= 0; \\ \mathbf{U}_{n+1}^{(0)} &= \mathbf{U}_n + \alpha\Delta t\dot{\mathbf{U}}_n; \\ \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{(0)} &= 0; \end{aligned}$$

Fase de Correção:

$$\begin{aligned} i &= i + 1; \\ \text{Calcule } \mathbf{R} &= \widehat{\mathbf{F}} - (\widehat{\mathbf{M}}\dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{i-1} + \widehat{\mathbf{K}}\mathbf{U}_{n+1}^{i-1}); \\ \text{Resolva } \widehat{\mathbf{M}}^*\Delta\dot{\mathbf{U}} &= \mathbf{R}; \\ \text{Atualize } \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^i &= \dot{\mathbf{U}}_{n+1}^{i-1} + \alpha\Delta\dot{\mathbf{U}}; \\ \text{Atualize } \mathbf{U}_{n+1}^i &= \mathbf{U}_{n+1}^{i-1} + \alpha\Delta t\Delta\mathbf{U}, \end{aligned}$$

onde

- $\widehat{\mathbf{M}}^* = \widehat{\mathbf{M}} + \alpha\widehat{\mathbf{K}}$ é uma matriz esparsa cuja ordem é o número de pontos nodais (macro) incógnitas;

- $\widehat{\mathbf{R}} = \widehat{\mathbf{F}} - [\widehat{\mathbf{M}}\dot{\mathbf{U}} + \widehat{\mathbf{K}}\mathbf{U}]$ é o vetor de resíduos em função dos valores iniciais da multicorreção dos valores nodais de $\dot{\mathbf{U}}$ e \mathbf{U} ;
- $\Delta\dot{\mathbf{U}}$ é a correção dos valores de $\dot{\mathbf{U}}$ para a próxima iteração;
- α é um parâmetro que estabelece o controle da estabilidade e precisão na integração no tempo. Neste trabalho, utiliza-se $\alpha = 0.5$ por conduzir a um método de segunda ordem e incondicionalmente estável.

O critério de parada do processo não linear (no espaço) é dado por

$$i \leq \text{maxiter} \text{ ou } \max_{j=1, \dots, n_{os}} |u_{h;j}^i - u_{h;j}^{i-1}| \leq \text{tol}_{DD}, \quad (1.26)$$

onde *maxiter* é o número máximo de iterações no espaço, n_{os} é o número de pontos nodais (macro) de \mathcal{T}_h e tol_{DD} é uma tolerância, definida por $\text{tol}_{DD} = 10^{-2}$.

Capítulo 2

Experimentos Numéricos

Nesta seção são apresentados alguns experimentos numéricos para avaliar a performance da metodologia apresentada neste relatório. Em todos os experimentos, são utilizados $tol_\xi = 10^{-10}$ em (1.13) e $\omega = 0.5$ em (1.18).

2.1 Exemplo 01 - Advecção em um campo de escoamento rotacional com solução suave

Este problema simula o transporte, em um problema de advecção-difusão, de uma função seno em um campo de velocidades rotativo. Os dados do problema são:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{I} \text{ com } \epsilon = 10^{-8}, \text{ onde } \mathbf{I} \text{ é o tensor identidade,}$$

$$f = \sigma = 0, \quad \Omega = (-0.5, 0.5) \times (-0.5, 0.5)$$

e o campo de velocidades é dado por

$$\mathbf{v} = (-y, x).$$

As condições de contorno são homogêneas, isto é,

$$u(x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \Gamma.$$

Na fronteira interna $\{(0, y); y \in [-0.5, 0]\}$ é prescrita a função

$$u(0, y) = -\text{sen}(2\pi y).$$

As soluções aproximadas obtidas com os métodos SUPG/CAU e DD são apresentadas na Fig. (2.1), utilizando uma malha 40×40 , $t_f = 10$ e $\Delta t =$

0.5. Devido à dominância dos efeitos advectivos, a condição de contorno imposta na fronteira interna deve ser propagada ao longo do domínio sem perda em sua amplitude, isto é, os efeitos difusivos sobre o transporte são mínimos. Observa-se que as soluções obtidas pelos dois métodos introduzem uma difusão efetiva que provoca uma dissipação não física.

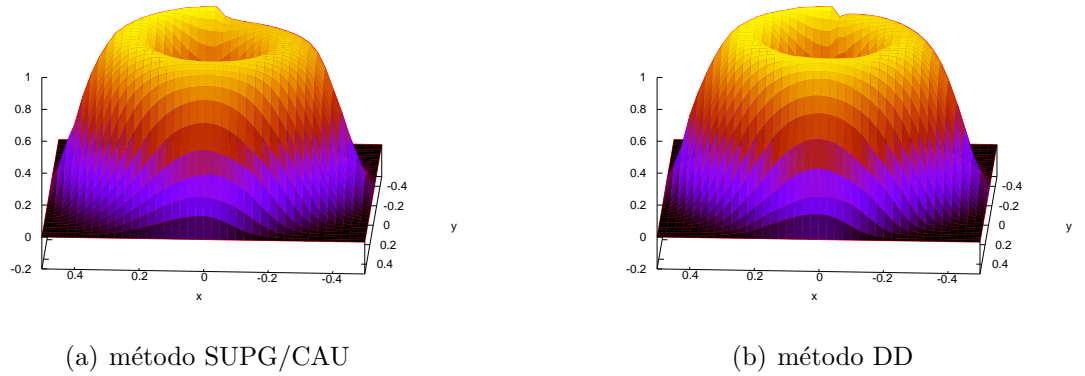


Figura 2.1: Exemplo 01 - Transporte rotativo: soluções aproximadas CAU e DD usando uma malha 40×40 .

2.2 Exemplo 02 - Problema de Advecção-Difusão-Reação

Neste exemplo é considerado um problema de advecção-difusão-reação, cuja solução exata e respectivas curvas de nível são apresentadas na Fig. 2.2. Os coeficientes de difusão e reação da equação são $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{I}$ com $\epsilon = 10^{-4}$ e $\sigma = 2$, respectivamente. O campo de velocidades é definido por

$$\mathbf{v} = (v_x, v_y),$$

onde

$$\begin{aligned} v_x &= -(2y - 1) [r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2]; \\ v_y &= (2x - 1) [r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2], \end{aligned}$$

para

$$0 \leq (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2 \leq r_0^2$$

e

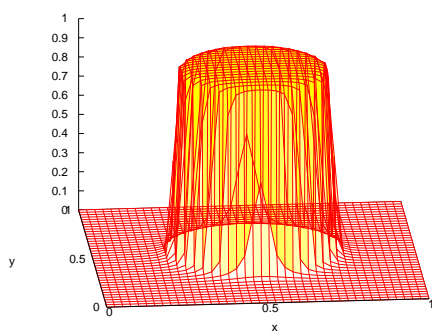
$$\mathbf{v} = (0, 0),$$

caso contrário. O termo de força e as condições de contorno de Dirichlet são escolhidas de forma que

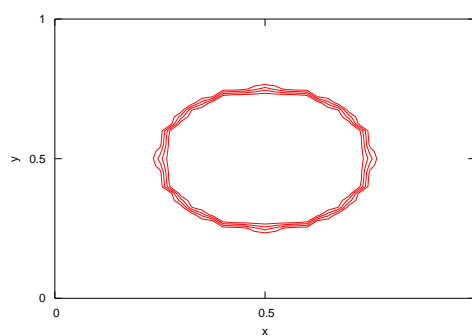
$$u(x, y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} [a(r_0^2 - (x - x_0)^2 - (y - y_0)^2)],$$

com $x_0 = y_0 = 0.5$, $r_0 = 0.25$ e $a = 1000$, é a solução exata do problema (Fig. 2.2).

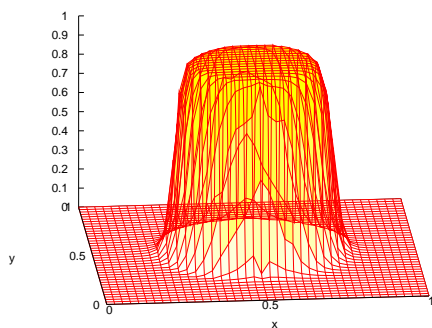
A solução aproximada juntamente com suas curvas de nível, usando o método DD são apresentadas na Fig. 2.2. Foi utilizada uma malha 40×40 , $t_f = 10$ e $\Delta t = 0.5$. A solução obtida pelo método DD representa a região de alto gradiente sem oscilações, porém com um comportamento relativamente difusivo, como pode ser melhor observado comparando suas curvas de nível com as da solução exata.



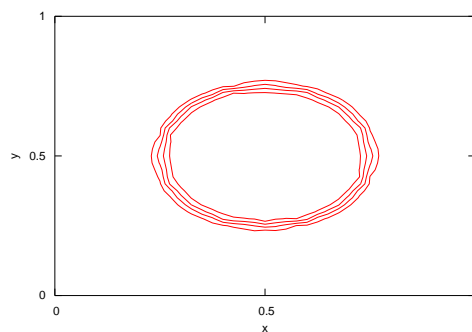
(a) Solução exata



(b) Curvas de nível da solução exata



(c) método DD



(d) Curvas de nível da solução do método DD

Figura 2.2: Exemplo 02 - soluções exatas e pelo método DD, usando uma malha 40×40 .

Agradecimentos

Os autores agradecem à Regina C. Almeida - LNCC (Laboratório Nacional de Computação Científica) pelas valiosas discussões e ao apoio recebido dentro do escopo dos projetos: PRONEX-FAPES/CNPq 48511579/2009, CNPq 309172/2009-8 e CNPq 552630/2011-0.

Referências Bibliográficas

- [1] N. C. B. Arruda, R. C. Almeida, and E. G. D. do Carmo. Dynamic diffusion formulations for advection dominated transport problems. in preparation for *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010.
- [2] F. Brezzi, L. D. Marini, and G. Sangalli. Link-cutting bubbles for the stabilization of convection-diffusion-reaction problems. *Mathematical Models and Methods in Applied Science*, 13:445–461, 2003.
- [3] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 32:199–259, 1982.
- [4] R. Codina. Stabilized finite element approximation of transient incompressible flows using orthogonal subscales. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191:4295–4321, 2002.
- [5] R. Codina and J. Blasco. Analysis of a stabilized finite element approximation of the transient convection-diffusion-reaction equation using orthogonal subscales. *Computing and Visualization in Science*, 4:167–174, 2002.
- [6] R. Codina, J. Principe, O. Guasch, and S. Badia. Time dependent subscales in the stabilized finite element approximation of incompressible flow problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:2413–2430, 2007.
- [7] J. Donea and A. Huerta. *Finite Element Methods for Flow Problems*. John Wiley and Sons, Ltd, 2003.
- [8] A.C Galeao and E.G.D Carmo. A consistent approximate upwind petrov-galerkin method for convection-dominated problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 68:83–95, 1988.

- [9] P. Gamnitzer, V. Gravemeier, and W. A. Wall. Time-dependent subgrid scales in residual-based large eddy simulation of turbulent channel flow. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:819–827, 2010.
- [10] J.-L. Guermond. Subgrid stabilization of galerkin approximations of linear monotone operators. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 21:165–197, 2001.
- [11] T. J. R. Hughes, L. P. Franca, and G. M. Hulbert. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: Viii. the galerkin-least-squares method for advective-diffusive equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 73:173–189, 1989.
- [12] T. J. R. Hughes, G. Scovazzi, and L. P. Franca. *Multiscale and Stabilized Methods, Encyclopedia of Computational Mechanics*. John Wiley & Sons, Ltd., 2004.
- [13] V. Iório. *EDP Um Curso de Graduação*. Coleção Matemática Universitária, IMPA, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.
- [14] C. Johnson. *Numerical Solutions of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Studentlitteratur, Lund, Sweden., 1987.
- [15] R. Juanes. *Displacement theory and multiscale numerical modeling of three-phase flow in porous media*. Phd thesis, Engineering - Civil and Environmental Engineering, University of California, Berkeley, 2003.
- [16] I. P. Santos. *Métodos Submalhas Não Lineares Para o Problema de Convecção-Difusão-Reação*. Tese de doutorado, Laboratório Nacional de Computação Científica - LNCC, Petrópolis, RJ, Outubro 2007.
- [17] I. P. Santos and R. C. Almeida. A nonlinear subgrid method for advection-diffusion problems. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 196:4771–4778, 2007.
- [18] I. P. Santos and R. C. Almeida. The nonlinear subgrid stabilization with discontinuity capturing. in preparation for *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2011.
- [19] C. Yang and J. Samper. A subgrid-scale stabilized finite element method for multicomponent reactive transport through porous media. *Transp Porous Media*, 78:101–126, 2009.